

СТАНОВИЩЕ

от проф. д-р Ивелина Мирчева Георгиева

Институт по обща и неорганична химия, БАН

на материалите за участие в конкурс за заемане на академичната длъжност „доцент“

в Институт по Органична химия с Център по Фитохимия (ИОХЦФ), БАН

в област на висше образование 4. Природни науки, математика информатика

професионално направление 4.2. Химически науки, научна специалност „Органична химия“

за нуждите на лаборатория „Структурен органичен анализ“ (СОА)

В конкурса за академичната длъжност „доцент“, обявен в Държавен вестник, бр. 40 от 16.05.2025 г. и на интернет-страницата на ИОХЦФ-БАН, участва един кандидат:

гл. ас. д-р Симеон Стоянов Стоянов; Stoyanov, Simeon S.; ORCID: 0000-0003-4356-5960; Scopus ID: 8504442200

Общо представяне на процедурата и кандидата. Представеният комплект материали (на електронен носител) за участие в конкурса е в съответствие с изискванията на ЗРАСРБ, Правилника за неговото прилагане в БАН и препоръчителните критерии на ИОХЦФ-БАН по ПН 4.2. Химически науки. Справката на посочените изисквания при заемане на АД „доцент“ показва, че Симеон Стоянов изпълнява необходимия минимум по всички групи показатели (А, В, Г, Д, Ж) и събира **727 т.** при общ изискван минимум 440 т.

Симеон Стоянов завършва висшето си образование във ФХФ при СУ с магистърска степен по органична и аналитична химия през 2001 г., а през 2010 г. в ИОХЦФ, той придобива образователната и научна степен „доктор“ по ПН 4.2 Химически науки, НС „Органична химия“. С наличие на докторска степен, кандидатът изпълнява показател „А“ (**50 т.**). В последователното си кариерно развитие в областта на Органичната химия, като асистент (2008-2010 г.) и главен асистент от 2011 г. в Лаборатория „Структурен органичен анализ“ при ИОХЦФ, д-р Стоянов има над 10 години трудов стаж по специалността. По време на научната си кариера кандидатът е специализирал в три европейски научни институции: Технологичен факултет, Университет Нови Сад, Сърбия и Черна гора, Лятно училище, 2004 г.; в Амстердам, Нидерландия, Обучение с програмен пакет МОЕ (Molecular Operating Environment), 2013 г.; Лайбниц институт по полимери, Дрезден, Германия, Обучение с Раман спектрометър, 2015 г. и се е обучавал в курс „Суперкомпютърни приложения в природните науки“ София, 2011 г.

Научно-изследователска дейност. В досегашната си научно-изследователска дейност, д-р Стоянов е съавтор в **32 научни статии** (по приложен списък) и **24** по база данни на SCOPUS и Web of Science (с данни от 2008 г.). Към момента на оформяне на документа, общият брой **цитирания** на публикациите е **105**, **Н-индекс 5** (SCOPUS) (без автоцитирания на всички съавтори), което отговаря на изискванията на ИОХЦФ-БАН, Н-индекс ≥ 5 .

В настоящия конкурс, д-р Стоянов участва с **26 оригинални научни публикации**, които изключват тези от докторския му труд (6). Статиите съответстват тематично на конкурса по НС „Органична химия“ и са публикувани в престижни реферирани списания като *Spectrochimica Acta A* (IF = 4.6), *Journal of Physical Chemistry A* (IF = 2.8), *Journal of the Electrochemical Society* (IF = 3.3), *Vibrational Spectroscopy* (IF = 3.1), *Molecules* (IF = 4.6) и др., което е признание за достойнствата на научните изследвания с участието на д-р Стоянов. Наукометричните показатели на кандидата са както следва: **24** статии за участие в конкурса са публикувани в индексирани научни издания и разпределени по квартали (за годината на публикуване) - **6 в Q1, 8 в Q2, 3 в Q3 и 7 в Q4** и две публикации са в

нереферирани списания. С публикационната си активност, д-р Стоянов изпълнява минималните критерии: 1) по ГП „В“ за хабилитационен труд върху **9** научни статии (изисквани 100 т./изпълнени **166 т.**), в **8** от научните статии по този списък, д-р Стоянов е първи автор; 2) по ГП „Г“ за научни трудове (**15**) (изисквани 220 т./изпълнени **273 т.**); 3) по ГП „Д“ за **119** цитирания (в SCOPUS (общо 105) и друга база данни (14)) върху всички публикации (без автоцитирания на съавтори) (изисквани 70 т./изпълнени **238 т.**).

В изпълнение на изискванията по конкурса за АД „доцент“, д-р Стоянов е представил **хабилитационен труд** на тема *„Приложение на вибрационната спектроскопия за изучаване на структурата и стабилността на анионни производни, съдържащи циано-, карбонил- и нитрогрупи. Експериментален и теоретичен подход“*. В тази справка по преценка на кандидата са включени 14 публикации от списъка за конкурса. Научният интерес на д-р Стоянов е насочен към получаване и охарактеризиране на органични аниони и съответни радикал-аниони в разтвор, на базата на полинитрилни, бензофенони, карба-, окси- азанионни и нитроароматни производни. Изследваните съединения са интермедиати в редица органични синтези и биохимични реакции или лекарствени форми, които в динамична биологична среда се трансформират в реактивоспособни радикали. Познаването на геометричните, енергетичните, кинетичните и термодинамичните характеристики и свойства на анионите и радикал-анионите междинни съединения е от изключителна важност и цели тяхното идентифициране в химични и биохимични процеси, което спомага за изясняване на биологичната им активност и механизма на действие.

Основен принос на д-р Стоянов в изследователския подход към анионните органични съединения в разтвор е умелото комбиниране на синтетични методи за получаване, специална експериментална ИЧ спектроскопска техника и квантовохимични изчисления. По-важните резултати от научно-изследователската работа могат да се обобщят, както следва:

1) Разработени са синтетични процедури за получаване на аниони (моно-, ди-, три-) с подбор на реагенти и разтворители. Изучени са:

- ролята на разтворителя (полярен, апропонен, неполярен) при формиране на анионите (агрегати или солватно-разделени);
- ефекта на разтворителя върху геометричната структура и вибрационните свойства на анионите;
- вибрационното поведение на разтворителя в това число и деутериран, с оглед да не се припокриват или да се отличат неговите ивици от тези на изследваните аниони.

Оценени са предимствата и недостатъците на серия разтворители и са подбрани най-подходящите (напр. диметилсулфоксид), които са слабо корозионни спрямо кювети от CaF_2 и стабилизират анионите. Разработени са техники за електрохимично получаване на радикал-аниони в среда от ДМСО и тетрабутиламониева сол, в квази-херметическа среда с използване на специална електролизна кювета.

2) Приложени са нетривиални спектроскопски техники (Инфрочервена, Раман и на изотопно белязани разтвори) и кювети с по-специални прозорци за регистриране на вибрационните ивици на аниони и радикал-аниони, съществуващи само в разтвор и характеризирани се с определена разтворимост, реактивоспособност и кратък живот. Въпреки специалните техники, получените спектроскопски данни не са еднозначни, заради сложните динамични процеси на анионите в разтвор.

3) Чрез моделиране на изследваните системи, следвайки експеримента и симулиране на вибрационните спектри, е получена задълбочена и надеждна информация за геометричната структура на анионите и радикал-анионите в разтвор и характерните за тях вибрационни свойства. Изчислителният протокол, по-специално DFT функционали и базисни функции, е валидиран по отношение на моделите в разтвор (моно-, ди-, три аниони, радикал-аниони и възможни изомери) и вибрационните им честоти. Чрез сравнителни подходи са оценени адекватността на солватиращите модели да симулират влиянието на разтворителя (глобално - РСМ, глобално и микросолватиране - ONION), както и точността на метода за геометрични параметри и вибрационни спектрални данни (честота и интензитет на ИЧ ивиците). Установено е, че включването на дифузни функции е необходимо за по-прецизното описание на геометричната и електронната структура на анионите и радикал-анионите и те намаляват анхармоничната корекция. С помощта на моделни изчисления на възможни геометрични структури и съответните вибрационни честоти и сравнение с експерименталните спектри са предсказани най-вероятните структури на анионите и радикал-анионите в разтвор и са интерпретирани надеждно наблюдаваните им вибрационни спектри. На базата на предсказаните структури (неутрална, анионна и радикал-анионна) и изчислените ИЧ честотите са изведени зависимости структура – спектър и са проследени геометрични, електронни (разпределение на електронната плътност) и спектроскопски промени при депротониране и радикалова реакция.

Научната дейност на д-р Стоянов е тясно обвързана с изпълнението на 14 проекта: два инфраструктурни на БАН и МОН, девет на ФНИ-МОН и три на ХТМУ-София. За разпространение на научните резултати, д-р Стоянов е участвал в 32 международни и национални научни форуми. Той е бил ръководил на успешно защитил магистър от ХТМУ, 2018 и е водил обучението на специализанти в Международно лятно училище по ИЧ спектроскопия и XRD приложение, 2013 г.

Коментар: Съгласно ПРАВИЛНИК за условията и реда за придобиване на научни степени и за заемане на академични длъжности в Института по органична химия с Център по фитохимия, БАН и „чл. 36(3) 13. списък на цитатите, участващи в конкурса, които не са представени по други конкурси за заемане на академични длъжности и придобиване на научни степени“, формално 10 цитата би трябвало да се изключат от списъка цитати по конкурса. Това не се отразява на изпълнението на критерий „Д“.

В заключение, високата оценка на изследванията с участието на д-р Стоянов, публикувани в индексирани научни списания, изследователските му приноси и активното участие в проекти доказват, че той е висококвалифициран и утвърдил се учен в областта на анионните производни на органични съединения – получаване и охарактеризиране с експериментални и теоретични подходи на вибрационната спектроскопия. Изследванията са в пълно съответствие с научната специалност “Органична химия“ на конкурса за „доцент“. Представеният анализ на материалите по конкурса ми дават основание убедено да гласувам **положително с „да“** и препоръчвам на Научното жури да предложи на Научния съвет на ИОХЦФ при БАН, главен асистент д-р Симеон Стоянов Стоянов да **бъде избран на академичната длъжност „доцент“ в ИОХЦФ-БАН** по професионално направление 4.2. Химически науки, научна специалност „Органична химия“.

05.09.2025 г.

Изготвил становището:

проф. д-р Ивелина Георгиева